



TITLE:

誘電体に於けるDiagram
Formulationに関して(京都大学,<特
集>修士論文で何がなされているか
)

AUTHOR(S):

金吉, 敬人

CITATION:

金吉, 敬人. 誘電体に於けるDiagram Formulationに関して(京都大学,<特集>修士論文で何がなされているか). 物性研究 1965, 4(1): 60-61

ISSUE DATE:

1965-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85707>

RIGHT:

複素数波動ベクトルを考慮に入れる場合、その際の差違を無視出来るとは限らない。いずれにしても、従来の簡単な反射係数の求め方では不充分のように思われる。

問題提起に終つてしまつたが、このような理論的問題を電子構造の知識と組み合せて解明していく必要がある。Imura らの束縛電子を反発ポテンシャルに置き換える事の物理的可否はその後の問題である。

誘電体に於ける Diagram Formulation に関して

金 吉 敬 人 (松原研)

現在スピン系の diagram formulation が精力的に研究されつつある。そこで双極子系に対し diagram formulation を適用しようと言うわけである。従来双極子系を統計力学的に取扱う手段として spherical model があり、M. Lax 等により研究されて来た。また Van Vleck に始る partition function を高温展開し初めの数項を数値計算し Onsager 方程式との定量的比較も幾人かの人々によつてなされてきた。

そこで diagram formulation によりこれらの事が何様な diagram 近似で説明できるか、また従来 spherical model は永久双極子系に対し適用されてきたが、これを永久双極子が誘起分極率を有する場合にも拡張することを研究目的とした。

現在これらの説明は可能である。大体はスピン系の diagram formulation と変らない。ただうるさい事は双極子-双極子相互作用が tensor である事だが、これも格子の対称性が高いと言う仮定をすると(事実 spherical model 及び Onsager 方程式は等方性の仮定が暗黙の内に含まれておる) diagram formulation で対角成分しか生じないことにより簡単になる。また Onsager 方程式は M. Lax に従い spherical model で特定の固有値を取ると良い。

修士論文で何がなされているか
従つてその固有値の近傍で級数展開すると Onsager 方程式からの deviation が生ずるであろう。

今後の問題として HBr 等の回転相転移を考えてみたいと思つておる。

強誘電体に於ける相転移の問題

— 秩序・無秩序型相転移に対する格子振動の影響 —

吉 光 浩 二 (松原研)

強誘電体に於ける相転移には変位型と秩序・無秩序型との二つがあり、これらの転移の機構は atomic な level で dynamical には解決されていない。そこで変位型の BaTiO_3 と秩序無秩序型の NaNO_2 について格子振動の面から調べてみた。

変位型の BaTiO_3 は、格子振動の或 mode (特に波数 $k=0$, optical mode) の不安定性により説明されているが、unharmonicity の取扱いが困難でまだ解決していない。

ここでは秩序無秩序型の NaNO_2 について簡単な model をえて転移の機構を調べて見た。 NaNO_2 は、 NaNO_2 に関する body centred orthorhombic system で NO_2 の配向に関する order-disorder type の相転移を行い、 $T_c = 163^\circ\text{C}$ で T_c 上約 1°C の温度中で sinusoidal antiferro 相が存在する。分極反転は NO_2 基の回転が主と考えられている。

ここで図の様に NO_2 基の回転を b 面内とし、 NO_2 基に二つの Na に一つの平衡点を仮点し、 NO_2 基がどちらの平衡点にいるかを (従つて向きを) 指定する変数 $P_n (= \pm 1)$ を導入

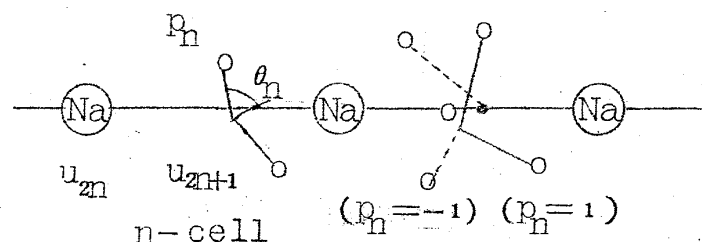


図 1